

改良二相系格子ボルツマン法における保存型拡散界面モデルの検討

A study of conservative diffuse-interface models of an improved two-phase lattice Boltzmann method

- 蓬萊文紀, 京大院, 京都市西京区京都大学桂 C3 棟, E-mail:horai.fuminori.72c@st.kyoto-u.ac.jp
中神貴裕, 京大, 京都市西京区京都大学桂 C3 棟, E-mail:nakagami.takahiro.72s@st.kyoto-u.ac.jp
稲室隆二, 京大院, 京都市西京区京都大学桂 C3 棟, E-mail:inamuro@kuaero.kyoto-u.ac.jp
Fuminori Horai, Dept. Aeronautics and Astronautics, Kyoto University, Kyoto 615-8540, Japan
Takahiro Nakagami, Dept. Aeronautics and Astronautics, Kyoto University, Kyoto 615-8540, Japan
Takaji Inamuro, Dept. Aeronautics and Astronautics, Kyoto University, Kyoto 615-8540, Japan

We study the mass conservation of each phase of an improved two-phase lattice Boltzmann method for two conservative diffuse interface models, the Cahn-Hilliard (C-H) equation and the conservative Allen-Cahn (A-C) equation. In order to compare the two models, we simulate a stationary sphere droplet, a binary droplet collision, a drop impact on a liquid film (milkcrown). As a result, we find that the conservative A-C equation is better in terms of the mass conservation of each phase than the C-H equation, but the conservative A-C equation may cause nonphysical simulation result. In addition, we can improve the mass conservation of each phase for the C-H equation by decreasing the mobility locally.

1. 緒言

気体と液体が入り混じった気液二相流は、空気中を落下する雨粒や牛乳が落下し跳ね返る際に観察されるミルククラウンのような身近な現象として存在する一方、液体燃料ロケットのエンジン内部で噴霧された燃焼液滴の挙動など、航空宇宙工学、機械工学化学工学をはじめ、様々な理工学分野で重要な研究課題となっている。これらの現象の特徴には、気液界面が時々刻々複雑に変化すること、流動形式が多様であること、微小なスケールで高速な変形挙動をすることが挙げられる。これらの特徴のため、気液二相流は実験による解析が困難である場合が多く、数値解析的研究および手法の開発が盛んに行われている。

そのような気液二相流の計算手法の1つとして、近年、二相系格子ボルツマン法⁽¹⁻⁸⁾が注目を集めている。この手法は系の自由エネルギーを考慮することにより自立的に界面が求まるため、界面形状の時間変化を陽に追跡する必要がないこと、また、各相の質量保存性が他の計算手法よりもよいこと、アルゴリズムが簡単であり並列計算に適しているといった利点を持っている。近年、Inamuro ら^{(1),(2)}は、高密度比の二相流に対して精度よく計算できる二相系 LBM を提案している。

二相系 LBM は、他の手法よりも優れた気液各相の質量保存性を有するが、そのさらなる向上に向けて様々な研究が行われている。その中で、保存型拡散界面モデルとして、Cahn-Hilliard (C-H) 方程式⁽⁹⁾と保存型 Allen-Cahn (A-C) 方程式⁽⁴⁾が用いられている。C-H 方程式では、衝突の際に生じる小さな液滴が時間経過にともなって縮小し、やがて消滅してしまうという現象が確認されている。この方程式は、系全体の質量保存性に優れており、また計算領域に対して大きな液滴や気泡は大きさが保持されるが、計算領域に対して小さいものは縮小し、最終的に消滅するように界面を発達させる。そのため、十分な各相の質量保存性があるとは言えない。この解決策の一つとして、界面発達速度のパラメータであるモビリティを調整し、観測対象の挙動の時間スケールの中での相変化を抑える方法がある⁽¹⁰⁾。一方、保存型 A-C 方程式は、系全体の質量保存性に加え、各相の質量保存性にも優れている保存型拡散界面モデルとして近年注目されている^(4,8)。しかし、連続的な界面が小さな液滴や気泡へと分解してしまうといった非物理的な現象が起こるといった欠点が指摘されている⁽¹¹⁾。

そこで本研究では、C-H 方程式と保存型 A-C 方程式の2つのモ

デルについて各相の質量保存性に着目して、より実際的な検証例題を用いてその有用性について検討する。まず、基本的な例題である静止液滴の計算を行い、次に液滴衝突、ミルククラウンの数値計算を行う。

2. 数値計算法

本研究では、保存型拡散界面モデルである C-H 方程式及び保存型 A-C 方程式を格子ボルツマン法に基づく計算スキームで解く。また、格子ボルツマン法における粒子速度は3次元15速度モデルを用い、粒子速度 c_i は以下のように与えられる。

$$[c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6, c_7, c_8, c_9, c_{10}, c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{14}, c_{15}] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

2. 1 Cahn-Hilliard (C-H) 方程式

C-H 方程式を解く手法は、Inamuro ら⁽²⁾の手法をベースとして、界面識別関数 ϕ を求める際に用いる速度分布関数 f_i^{eq} を求める部分を変更している。Inamuro ら⁽²⁾を参考に、界面発達速度のパラメータであるモビリティ M を調整するために、以下のように、界面識別関数 ϕ を計算する。

$$\phi(x, t + \Delta t) = \sum_{i=1}^{15} f_i^{eq}(x - c_i \Delta x, t). \quad (2)$$

ここで、以下の速度分布関数 f_i^{eq} を用いる。

$$f_i^{eq} = H_i \phi + F_i \left[p_0 - \kappa_f \phi \nabla^2 \phi - \frac{\kappa_f}{6} |\nabla \phi|^2 \right] + 3E_i \phi c_{i\alpha} u_\alpha + E_i \kappa_f G_{\alpha\beta}(\phi) c_{i\alpha} c_{i\beta} + E_i C \left(\frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} \right) c_{i\alpha} \Delta x. \quad (3)$$

ここで、 C はモビリティを決めるパラメータ、 κ_f は界面厚さを決めるパラメータであり、 E_i , F_i , H_i , p_0 , $P_{\alpha\beta}$ は以下のように与える。

$$\begin{aligned}
 E_1 &= 2/9, E_2 = E_3 = E_4 = \dots = E_7 = 1/9, \\
 E_8 &= E_9 = E_{10} = \dots = E_{15} = 1/72, \\
 H_1 &= 1, H_2 = H_3 = H_4 = \dots = H_{15} = 0, \\
 F_1 &= -3/7, F_i = 3E_i (i = 2, 3, 4, \dots, 15).
 \end{aligned} \quad (4)$$

$$G_{\alpha\beta}(\phi) = \frac{9}{2} \frac{\partial\phi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial\phi}{\partial x_\beta} - \frac{3}{2} \frac{\partial\phi}{\partial x_\gamma} \frac{\partial\phi}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta}. \quad (5)$$

$$p_0 = \phi T \frac{1}{1 - b\phi} - a\phi^2. \quad (6)$$

$$P_{\alpha\beta} = \left[p_0 - \kappa_f \phi \frac{\partial^2\phi}{\partial x_\gamma^2} - \frac{\kappa_f}{2} \left(\frac{\partial\phi}{\partial x_\gamma} \right)^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \kappa_f \frac{\partial\phi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial\phi}{\partial x_\beta}. \quad (7)$$

ここで, a, b, T は界面識別関数の最大値, 最小値を決めるパラメータである。

また, 密度 ρ は次式で求める。

$$\rho = \begin{cases} \rho_G, & \phi = \phi_{\min}, \\ \frac{\Delta\rho}{2} \left[\sin\left(\frac{\phi - \bar{\phi}}{\Delta\phi} \pi\right) + 1 \right] + \rho_G, & \phi_{\min} < \phi < \phi_{\max}, \\ \rho_L, & \phi = \phi_{\max}. \end{cases} \quad (8)$$

ここで, ϕ_{\max} および ϕ_{\min} は, それぞれ各ステップにおける ϕ の最大値, 最小値である。また, $\Delta\rho = \rho_L - \rho_G$, $\Delta\phi = \phi_{\max} - \phi_{\min}$,

$\bar{\phi} = (\phi_{\max} + \phi_{\min})/2$ である。ただし, ρ_G は気相の密度, ρ_L は液相の密度である。

このとき, C-H 方程式におけるモビリティ M は, 以下の関係で表される。

$$M = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} C \right) \Delta x. \quad (9)$$

このモビリティ M の大きさに二相の挙動は大きく依存する。本研究では, 小さな液滴や気泡が生まれるような領域のモビリティを小さくすることで, 大域的な挙動を崩さずに, それらを保持できるかどうか検討する。

2. 2 保存型 Allen-Cahn (A-C) 方程式

保存型 A-C 方程式を解く手法は, Inamuro ら²⁾の手法をベースとして, 速度分布関数 f_i^{eq} から界面識別関数 ϕ を求める部分, 識別関数 ϕ から密度 ρ を求める部分を変更している。

Wang ら³⁾を参考に, 以下のように界面識別関数 ϕ を求める。

$$\begin{aligned}
 \phi(\mathbf{x}, t + \Delta t) &= \sum_{i=1}^{15} [f_i^{eq}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t) + A E_i \{ \phi(\mathbf{x}, t) \\
 &\quad - \phi(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t) \}].
 \end{aligned} \quad (10)$$

ここで, A はモビリティを決めるパラメータであり, 以下の速度分布関数 f_i^{eq} を用いる。

$$f_i^{eq} = E_i \phi (1 + 3c_{i\alpha} u_\alpha) + 3E_i c_{i\alpha} n_\alpha M' \theta. \quad (11)$$

ここで, n_α, θ, M' は以下の通りである。

$$n_\alpha = \frac{\partial\phi}{\partial x_\alpha} / \sqrt{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_\gamma} \right)^2}. \quad (12)$$

$$\theta = \frac{1 - 4\phi^2}{W}. \quad (13)$$

$$M' = \frac{1}{6} \Delta x. \quad (14)$$

ここで, W は界面厚さを決めるパラメータである。

また, 密度 ρ は次式で求める。

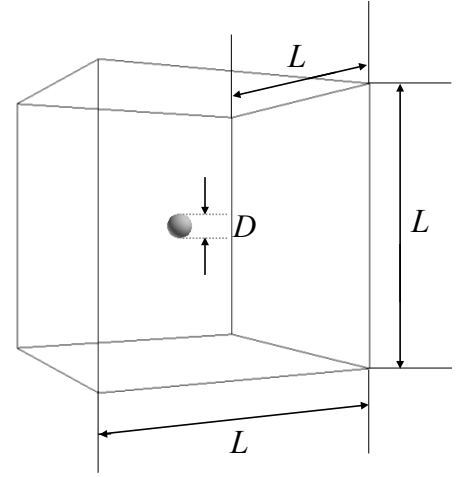


Fig. 1. Computational domain for a stationary droplet.

$$\rho = \begin{cases} \rho_G, & \phi = \phi_{\min}, \\ \frac{\phi - \phi_{\min}}{\phi_{\max} - \phi_{\min}} (\rho_L - \rho_G) + \rho_G, & \phi_{\min} < \phi < \phi_{\max}, \\ \rho_L, & \phi = \phi_{\max}. \end{cases} \quad (15)$$

このとき, 保存型 A-C 方程式におけるモビリティ M は以下の関係で表される。

$$M = \frac{1}{6} (1 - A) \Delta x. \quad (16)$$

3. 数值計算例

2つの拡散界面モデルの各相の質量保存性の比較を行うために, 静止液滴の数值計算を行った。今回は質量保存性を検証するために計算領域に対して小さな液滴が存在する条件で計算した。次に, 実際的な検証例題として液滴衝突及びミルククラウムの数值計算を行い, 2つの手法の有用性を検討した。

3. 1 静止液滴

(a) 計算条件

計算領域は一辺 $L = 96\Delta x$ の立方体領域とし, その中心に直径 $D = 10\Delta x$ の液滴を配置する (Fig. 1)。計算領域の外壁はすべて周期境界である。液滴および気体の密度はそれぞれ $\rho_L = 50$, $\rho_G = 1$ とし, 液滴および気体の粘性係数はそれぞれ $\mu_L = 8.0 \times 10^{-2} \Delta x$, $\mu_G = 1.6 \times 10^{-3} \Delta x$ とする。界面張力は $\sigma = 1.2 \times 10^{-2} \Delta x$ とした。界面識別関数 ϕ の計算におけるパラメータは C-H 方程式では $T = 3.5 \times 10^{-2}$, $a = 1$, $b = 6.7$, $\kappa_f = 0.5(\Delta x)^2$ とした。このとき, 界面識別関数 ϕ の最大値と最小値はそれぞれ $\phi_{\max} = 9.714 \times 10^{-2}$, $\phi_{\min} = 1.134 \times 10^{-2}$ となる。また, 保存型 A-C 方程式における界面の厚さを決めるパラメータは $W = 4$ とした。また, モビリティについて, C-H 方程式では, $M = 1/6 (\Delta x)$, $1/100 (\Delta x)$ の計算を行い, 保存型 A-C 方程式では, $M = 1/100 (\Delta x)$ とした。また, 圧力計算の反復回数は2回とし, 音速を調整するパラメータは $\omega_{\max} = 25$, 計算の安定性に関するパラメータは $\lambda = 1$ とした。

(b) 計算結果

得られた静止液滴の半径の推移を Fig. 3 に示す。C-H 方程式では, モビリティの大小に関わらず, 徐々に液滴は縮小していくものの, モビリティを小さくすることで, 長い時間経過した後でも小さな液滴を保持できていることが確認された。一方, 保存型 A-C 方程式では液滴半径はほぼ一定になっており, その大きさを保持できている様子が確認された。

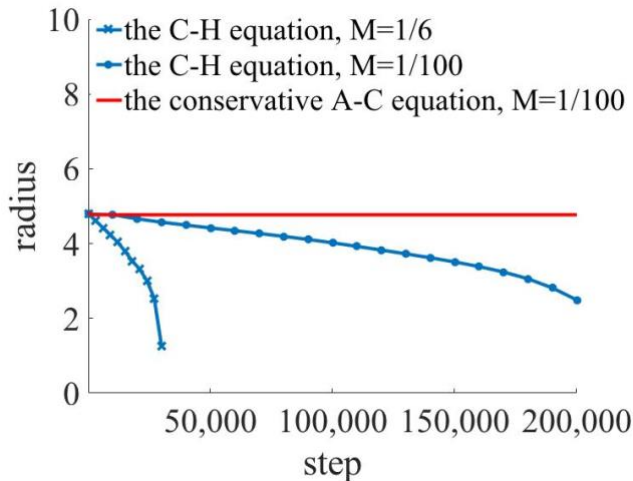


Fig. 2. Radius of stationary sphere droplet.

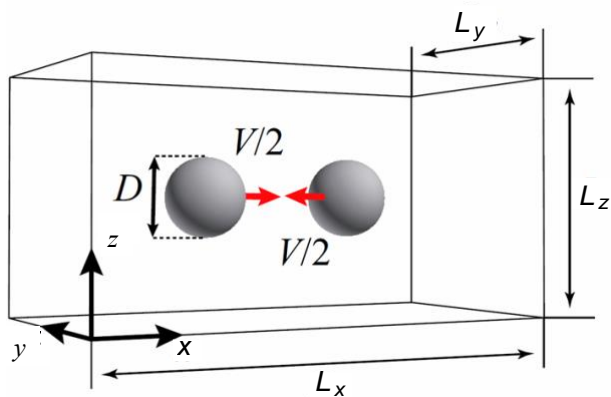


Fig. 3. Computational domain for binary droplet collision.

4. 2 液滴衝突

(a) 計算条件

計算領域は $L_x \times L_y \times L_z$ の直方体領域とし、 $L_x = 384\Delta x$, $L_y = 192\Delta x$, $L_z = 192\Delta x$ とした (Fig. 3). 直径 $D = 64\Delta x$ の 2 つの液滴を x 方向に中心間距離 $2D$ だけ離して配置し、相対速度 $U = 0.05$ で正面衝突させる。なお、計算領域の外壁はすべて周期境界である。液滴および気体の密度はそれぞれ $\rho_L = 50$, $\rho_G = 1$ とし、液滴および気体の粘性係数はそれぞれ $\mu_L = 8.0 \times 10^{-2}\Delta x$, $\mu_G = 1.6 \times 10^{-3}\Delta x$ とする。界面張力は $\sigma = 2.0 \times 10^{-1}\Delta x$ とした。界面識別関数 ϕ の計算におけるパラメータは $T = 3.5 \times 10^{-2}$, $a = 1$, $b = 6.7$, $\kappa_f = 0.5(\Delta x)^2$ とした。また、A-C 方程式では、 $W = 4$ とした。またどちらの手法も、モビリティ $M = 1/10(\Delta x)$ とした。また、圧力計算の反復回数は 2 回とし、音速を調整するパラメータは $\omega_{\max} = 25$ 、計算の安定性に関するパラメータは $\lambda = 10$ とした。系の支配パラメータである Re 数、 We 数はそれぞれ $Re = \rho_L U D / \mu_L = 2000$, $We = \rho_L U^2 D / \sigma = 40$ である。

(b) 計算結果

得られた液滴の挙動を Fig. 4 に示す。C-H 方程式では、衝突時のトーラス型の形成やサテライトの発生など実験⁽³⁾で確認される現象が見られた。一方、保存型 A-C 方程式では、大まかな挙動は実験での現象と似ているが、衝突後の跳ね返り途中で非対称な結果が得られるだけでなく、界面付近から細かい液滴が飛び出している現象が確認された。このように、保存型 A-C 方程式を用いると非物理的な現象が出てくることが予想され、実用的な計算においても不具合が生じる可能性があると考えられる。

4. 3 ミルククラウン

2 つの保存型界面モデルを用いて、ミルククラウン (密度比 800) の計算を行った。C-H 方程式では、小さな液滴が生じる領域のモビリティを局所的に小さくすることで、大域的な挙動を保ちつつ、小さな液滴を保持できるかどうか検討し、保存型 A-C 方程式では、液滴衝突で見られたような非物理的な現象が生じるかどうか検討することで、2 つの保存型拡散界面モデルの有用性を検討する。結果の詳細は講演で述べる。

4. 結言

二相格子ボルツマン法における保存型拡散界面モデルについて各相の質量保存性を検討した。静止液滴の数値計算から保存型 A-C 方程式は領域内の小さな液滴を保持できるような優れた質量保存性を持つことが確認された。一方、C-H 方程式はモビリティを小さくすることで小さな液滴の縮小する速さを抑えられた。また、液滴衝突の数値計算から実用的な計算において保存型 A-C 方程式が非物理的な結果を生む可能性があることが示唆された。

今後の課題として、気泡流といった他の実用的な検証例題を行い、2 つの保存型界面モデルの有用性を検討することが挙げられる。

5. 謝辞

本研究の一部は、平成 29, 30 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 (ID: hp170043, hp180020) により、京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータ CRAY XC40 を利用して実施した。また、科研費・基盤研究 (C) 課題番号 17K06155 の一部として実施した。

参考文献

- (1) T. Inamuro, T. Yokoyama, K. Tanaka, An improved lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences, *Comput. Fluids*, 137 (2016), 55-69.
- (2) T. Inamuro, T. Echizen, F. Horai, Validation of an improved lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows, *Comput. Fluids*, 175 (2018), 83-90.
- (3) Y. Wang, C. Shu, L. Yang, H. Yuan, Development of axisymmetric lattice Boltzmann flux solver for complex multiphase flows, *J. Mod. Phys. B*, 32 (2018), 1840005.
- (4) P.-H. Chiu, Y.-T. Lin, A conservative phase field method for solving incompressible two-phase flows, *J. Comput. Phys.*, 230 (2011), 185-204.
- (5) A. Fakhari, D. Bolster, L. Luo, A weighted multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method for multiphase flows and its application to partial coalescence cascades, *J. Comput. Phys.*, 341 (2017), 22-43.
- (6) M. Geier, A. Fakhari, T. Lee, Conservative phase-field lattice Boltzmann model for interface tracking equation, *Phys. Rev. E*, 91 (2015), 063309.
- (7) H. L. Wang, Z. H. Chai, B. C. Shi, H. Liang, Comparative study of the lattice Boltzmann models for Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations, *Phys. Rev. E*, 94 (2016), 033304.
- (8) N. Takada, J. Matsumoto, S. Matsumoto, K. Kurihara, Phase-field model-based simulation of two-phase fluid motion on partially wetted and textured solid surface, *J. Comput. Sci.*, 17 (2016), 315-324.

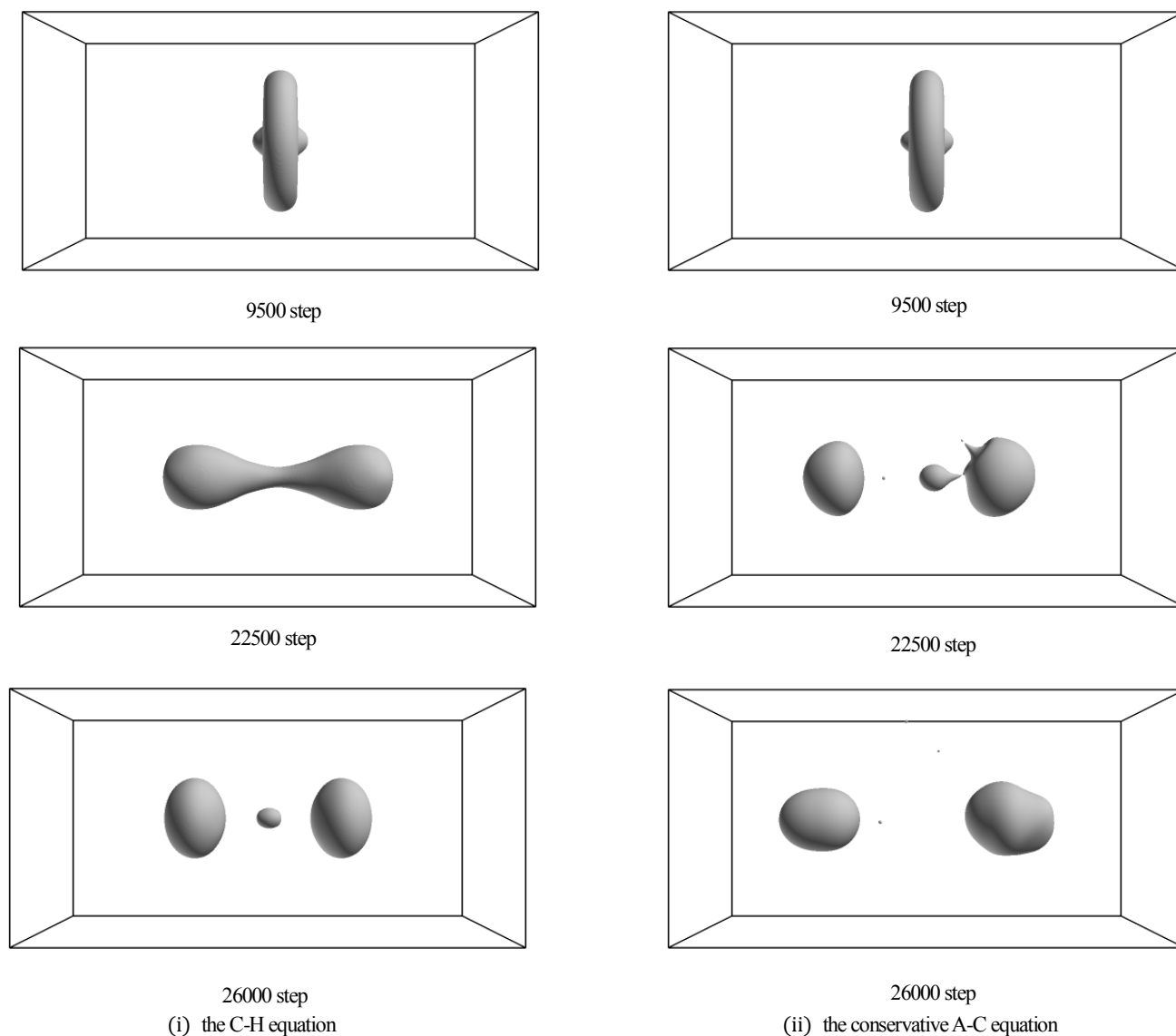


Fig. 4. Time evolution of droplet shape for (i) the C-H equation and (ii) the conservative A-C equation.

- (9) J. W. Cahn, A. E. Hilliard, Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy, *J. Chem. Phys.*, 28 (1988), 258-267.
- (10) P. Yue, C. Zhou, J. J. Feng, Spontaneous shrinkage of drops and mass conservation in phase-field simulations, *J. Comput. Phys.*, 223 (2007), 1-9.
- (11) T. Lee, Tutorial: Interface Tracking, Surface Tention, and Discretization in Multi-phase Lattice Boltzmann Method, 27th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics, Worcester Polytechnique Institute, MA, USA, June 28, 2018
- (12) T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima, N. Konishi, A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences, *J. Comput. Phys.*, 198 (2004), 628-644.
- (13) N. Ashgriz, J. Y. Poo, Coalescence and separation in binary collisions of liquid drops, *J. Fluid Mech.*, 221 (1990), 183-204.